

## 第12回大型計算成果発表会

### 電子計算機センター 第12回大型計算成果発表会 「使用プログラムの特徴と研究成果の報告」

|     |                        |
|-----|------------------------|
| 日 時 | 平成4年9月9日（水） 9:30～12:35 |
| 場 所 | 分子研 研究棟 101号室          |

## プログラム

|       |  |
|-------|--|
| 9:30  | 挨拶 センター長   |
| 9:35  | 土井 正男、金田 行雄、関本 謙、福本 康秀、 <u>松本 充弘</u> 、白田 茂男、シー ハワード、（名大 工）、榎本 美久（名大理）<br>複合液体の非線形ダイナミックス |
| 10:05 | 石井 晃、 <u>逢坂 豪</u> （鳥取大 教養）、新藤 茂、新田 英雄（東学大 教育）<br>表面吸着系によるポジトロニウム分光の計算のプログラム開発            |
| 10:35 | 山邊 時雄、田中 一義、 <u>立花 明知</u> 、御崎 洋二、石川 滋、山口 耕一郎、佐原 渉、佐藤 徹（京大 工）<br>化学反応の動的過程に関する理論的研究       |
| 11:05 | <u>小林 久芳</u> （京府大 生活科学）、田中 康裕（京大 工）<br>金属および金属酸化物クラスターの電子状態と反応性に関する量子化学的研究               |
| 11:35 | <u>酒井 章吾</u> 、中村 方哉（大産大 工）<br>化学反応の分類および分子設計に関する理論的考察                                    |
| 12:05 | <u>山辺 信一</u> （奈良教育大 教育）<br>基準振動に沿う構造変形とフロンティア軌道の相関                                       |